Химическая связь как основная проблема современной химии и физики.

Безверхний Владимир Дмитриевич, Безверхний Виталий Владимирович.

Украина, e-mail: bezvold@ukr.net

Резюме: Образование химической связи рассматривается с общетеоретической точки зрения как взаимодействие различных фермионов. Показано, что используя современные классические представления о химической связи невозможно получить (строго теоретически) физическое обоснование причины образования химической связи. Показана неприменимость принципа Паули к химической связи и предложена новая теоретическая модель химической связи, основанная на принципе неопределенности Гейзенберга.

Ключевые слова: фермион, трехэлектронная связь, химическая связь и специальная теория относительности А. Эйнштейна, принцип неопределенности Гейзенберга и химическая связь, принцип запрета Паули и химическая связь, теория резонанса Л. Полинга и химическая связь.

ВВЕДЕНИЕ.

Химию в теоретическом аспекте можно рассматривать как науку о химической связи (химическая реакция есть фактически разрыв «старых» химических связей и образование «новых» химических связей) и поэтому, теоретическое обоснование причины образования химической связи является фундаментальным как для теоретической химии, так и для синтетической химии, поскольку является основой для их дальнейшего развития. Как было показано ранее [1], химическую связь можно рассматривать как взаимодействие фермионов, а поскольку фермионы являются частицами с полуцелым спином, то логически следует, что взаимодействие двух

электронов (спин электрона ½) образует двухэлектронную связь, а взаимодействие двух трехэлектронных связей (через цикл) в бензоле образует ароматическую связь (трехэлектронная связь – типичный фермион со спином ½); в общем случае мы имеем взаимодействие одного фермиона с другим фермионом (один фермион может быть неспаренным электроном, а другой фермион, например, трехэлектронной связью и т. п.).

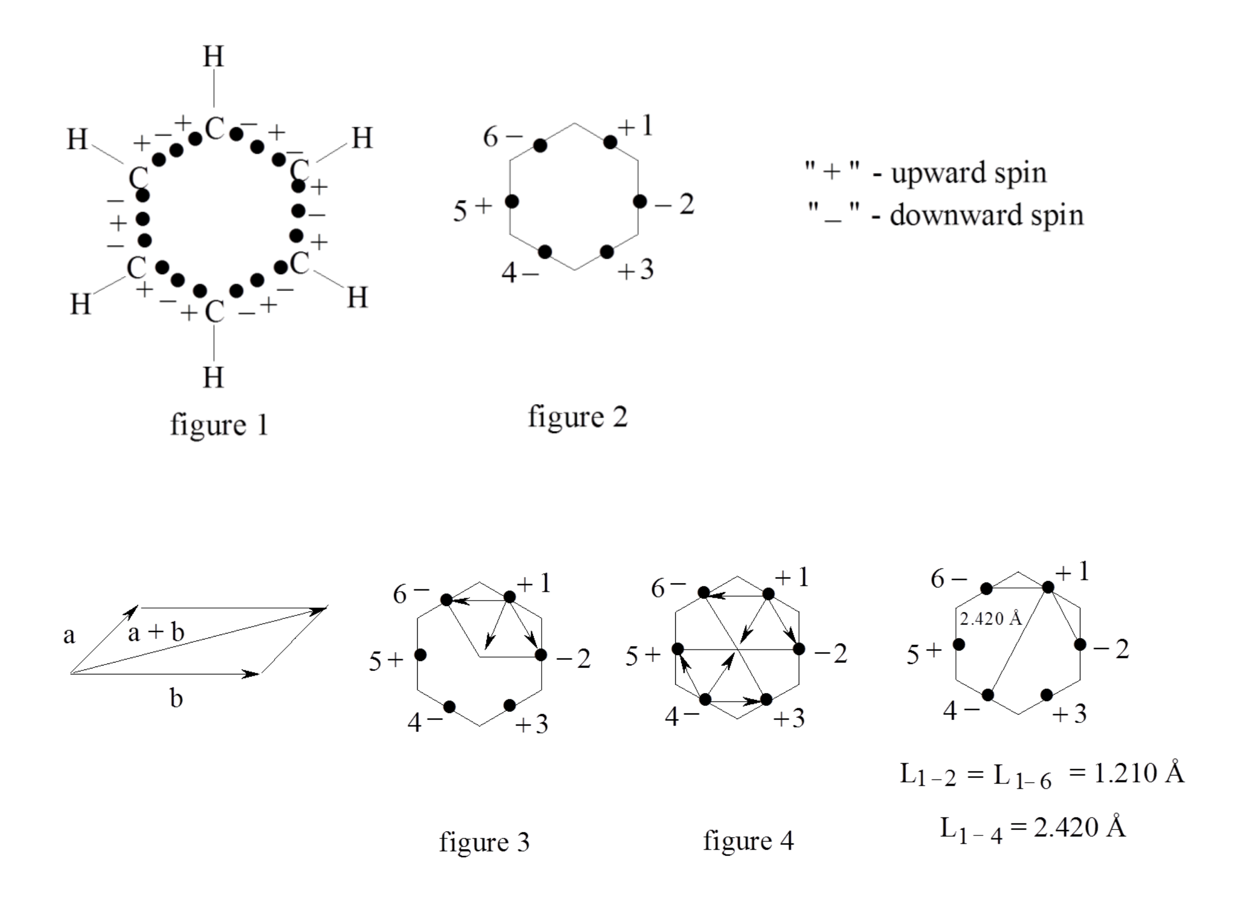
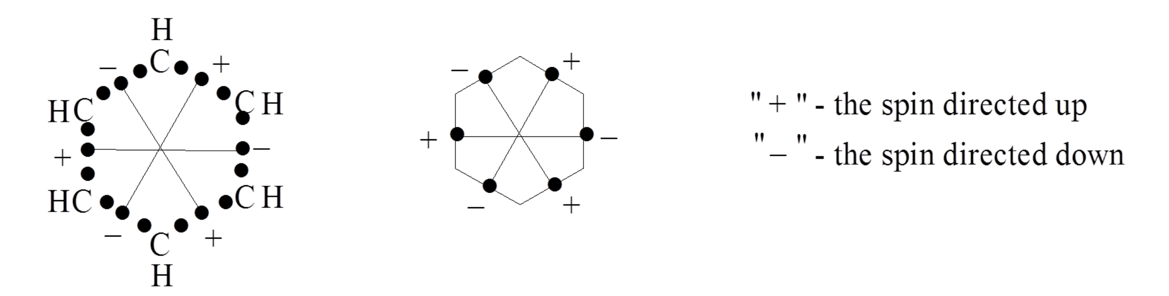


figure 1

figure 2

figure 3

figure 4



При изучении химической связи переход от электронов к фермионам был очень успешным, так как он вывел теорию химической связи на более общие теоретические

позиции и показал, что химическая связь является полувиртуальной частицей [1].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ.

Правило Хюккеля, фермионы и теория Линетта.

Рассмотрим правило Хюккеля (которое фактически регулирует взаимодействие фермионов в ароматических системах) и теорию Линетта с позиций взаимодействия фермионов.

Правило Хюккеля (4n + 2) для ароматических систем можно записать и в другом виде, в виде 2n, где n - непарное число. Итак, имеем: 2, 6, 10, 14, 18 электронов и т. д. Это справедливо и для электронных оболочек в атоме, и для ароматических систем. Принцип взаимодействия фермионов всегда один и везде.

А теперь нужно вспомнить Дж. Линетта с его теорией двойного квартета [2]. Дж. Линетт был прав. Только нужно учесть, что химическая связь есть взаимодействие фермионов (здесь они дублеты) с противоположно направленными спинами, и то, что октет (одиночный атом, а вообще атомы образуют химическую связь) состоит из суммы электронов на разных уровнях s-, p-, d- (для одиночного атома) и т. д.

Рассмотрим атом: тогда на s-уровне взаимодействуют два фермиона (1 (+) и 1 (-)), на p-уровне также взаимодействуют два фермиона (3 (+, -, +) и 3 (-, +, -)), аналогично два фермиона взаимодействуют и на d-уровне (5 (+, -, +, -, +) и 5 (-, +, -, +, -)). Но, все эти фермионы состоят из разного количества электронов, для s-уровня это 1 электрон (+), для p-уровня это 3 электрона (+, -, +), а для d-уровня это 5 электронов (+, -, + , -, +). Правило Хюккеля четко определяет количество электронов необходимое для получения фермиона (поэтому, n - непарное число, 2n). Учитывая количество электронов на разных уровнях (s-, p-, d-), мы получаем общее количество электронов, соответствующее правилу октета (2, 8 и т. д.). Что особенно важно для минимизации отталкивания

между электронами, необходимо, чтобы отдельные фермионы состояли из электронов спины которых имеют разное направление (то есть, соседние электроны должны иметь противоположно направленные спины, например, для фермионов, состоящих из трех электронов, имеем: 1 (+), 2 (-), 3 (+)). Естественно, два взаимодействующих фермиона имеют в целом противоположно направленые спины 1 (+) и 2 (-).

Теперь рассмотрим бензол. Как было показано [1, стр. 2] в бензоле между атомами углерода существует трехэлектронная связь (фермион), которая взаимодействует через цикл с другой трехэлектронной связью (с другим фермионом). Если применить идею Линнета к шести p-электронам в бензоле, то бензол будет самой сутью взаимодействия фермионов (или двух дублетов): 3 (+, -, +) и 3 (-, +, -). Если взять более общий случай, то есть, все 18 электронов бензола, то тогда у нас есть два взаимодействующих фермиона, каждый из которых состоит из 9 электронов (9 (+) и 9 (-)). Естественно, эти два фермиона помещены в поле из шести ядер углерода.

Обратимся теперь к химическим связям разной кратности.

Рассмотрим одинарную двухэлектронную связь: мы имеем взаимодействие между двумя фермионами, то есть, между двумя электронами (1 (+) и 2 (-)).

Двойную четырехэлектронную связь следует рассматривать как комбинацию двух одинарных двухэлектронных связей. И здесь нельзя не вспомнить идею Л. Полинга об описании кратных связей посредством изогнутых связей [3, 4]. Представить двойную связь как взаимодействие между двумя фермионами нельзя, так как два электрона с противоположными спинами образуют бозон (изогнутая связь). В принципе, двойную связь можно рассматривать как взаимодействие двух бозонов, которые за счет отталкивания дают две эквивалентные изогнутые связи (бозоны стремятся занять один энергетический уровень).

Тройная шестиэлектронная связь рассматривалась Полингом как сочетание трех изогнутых одинарных связей, а с использованием представлений Линнета (что на наш взгляд более верно) мы можем представить ее как взаимодействие между двумя фермионами (две трехэлектронные связи, два дублета), которые имеют противоположные спины (3 (+, - +) и 3 (-, +, -)). Здесь, как и в бензоле, взаимодействуют шесть электронов, но теперь они расположены между двумя атомами углерода (в бензоле между шестью атомами углерода). Это описание подтверждается тем, что тройная связь менее «ненасыщенна» и обладает более специфическими свойствами по сравнению с двойной связью.

Из вышесказанного понятно, что образование октетов, ароматических систем и в целом химических связей представляет собой взаимодействие фермионов в различных состояниях, что приводит к разнообразию химических систем.

Причина образования химической связи.

Причина образования химической связи до сих пор не ясна, фактически нет физического обоснования, как это было во времена Н. Бора, так как образование химической связи не следует из четырех фундаментальных взаимодействий. Только представьте, химическая связь «не понимает», что ее нельзя объяснить нормально и спокойно существует... Полное объяснение химической связи может дать только квантовая механика (в будущем), классические подходы просто не работают.

Чтобы понять это, надо не забывать то, что сделал Л. Полинг [5, 6], а именно Полинг проанализировал взаимодействие атома водорода и протона на всем диапазоне длин (он допустил, что атом водорода и H+ сохраняются при сближении, и показал, что связь в этом случае не образуется (поскольку нет обменного взаимодействия или резонанса по Полингу)). Только один этот факт фактически разрушает классический подход применяемый для объяснения химической связи (кулоновское притяжение и

отталкивание). Отсюда неизбежно следует, что химическая связь есть квантово-механический эффект и никакой другой.

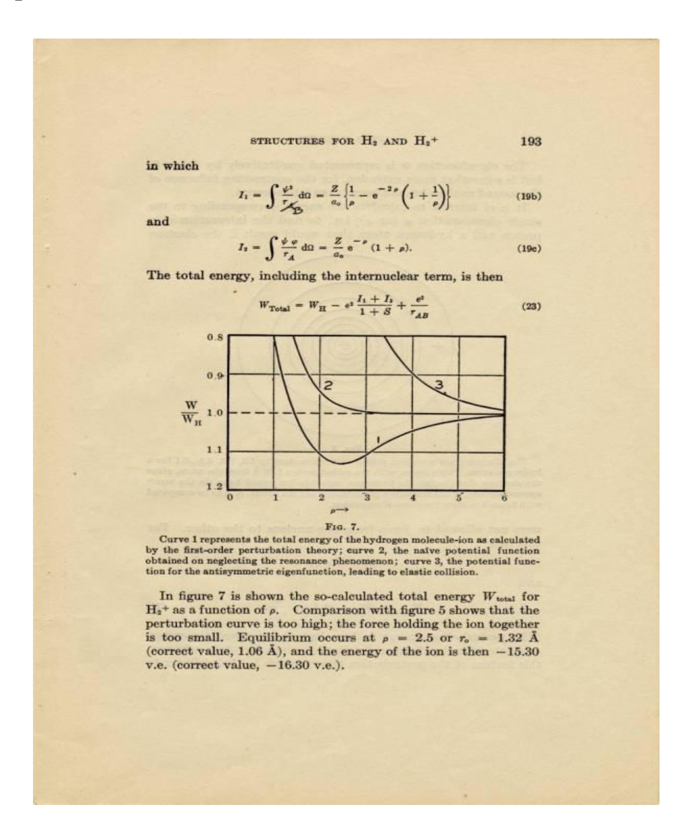
Представьте себе систему с двумя протонами и одним электроном, но если рассматривать ее как атом водорода и протон, то связь не может образоваться во всем диапазоне длин. Но, как показал Буррау [7], связь в H_2^+ образуется (если рассматривать систему как два протона и один электрон), и в этом особо никто не сомневается, поскольку H_2^+ существует. Особо подчеркну, что электрон всего один (нет межэлектронного отталкивания и т. д.).

После этого факта дальнейшие рассуждения продолжать нельзя, поскольку они не имеют смысла (особенно применять это к объяснению двухэлектронной связи или ароматической, это несколько другой уровень сложности). Но тем не менее следует отметить, что квантовая механика ввела понятие «обменное взаимодействие», которое не имея физического обоснования (поскольку никакие фундаментальные взаимодействия не изменяются при обмене электронами, а должны были бы, если связь образуется) смогло объяснить химическую связь (точнее, «замаскировать» химическую связь в квантово-механический эффект «обменное взаимодействие»), тем самым подтвердив, что химическая связь действительно является квантово-механическим эффектом.

Наука о химической связи находится только в начале своего пути, и сегодняшние студенты должны внести наиболее значительный вклад в теорию химической связи. Несомненно, что это приведет к коренным изменениям в понимании как химии, так и физики.

На основе современных представлений квантовой механики нельзя объяснить химическую связь, нужны фундаментальные допущения в самой квантовой механике...

На фото страница из работы Л. Полинга (стр. 193) «The application of the quantum mechanics to the structure of the Hydrogen molecule and Hydrogen molecule-ion and to related problems» [5]:



STRUCTURES FOR H_2 AND H_2^+ 193

in which

$$I_1 = \int \frac{\psi^2}{r_B} d\Omega = \frac{Z}{a_0}\left\{\frac{1}{\rho} - e^{-2\rho}\left(1 + \frac{1}{\rho}\right)\right\} \quad (19b)$$

and

$$I_2 = \int \frac{\psi\varphi}{r_A} d\Omega = \frac{Z}{a_0} e^{-\rho}(1 + \rho). \quad (19c)$$

The total energy, including the internuclear term, is then

$$W_{Total} = W_H - e^2\frac{I_1 + I_2}{1 + S} + \frac{e^2}{r_{AB}} \quad (23)$$

Fig. 7.

Curve 1 represents the total energy of the hydrogen molecule-ion as calculated by the first-order perturbation theory; curve 2, the naïve potential function obtained on neglecting the resonance phenomenon; curve 3, the potential function for the antisymmetric eigenfunction, leading to elastic collision.

In figure 7 is shown the so-calculated total energy W_{total} for H_2^+ as a function of ρ. Comparison with figure 5 shows that the perturbation curve is too high; the force holding the ion together is too small. Equilibrium occurs at $\rho = 2.5$ or $r_0 = 1.32$ Å (correct value, 1.06 Å), and the energy of the ion is then −15.30 v.e. (correct value, −16.30 v.e.).

Химическая связь и специальная теория относительности А. Эйнштейна.

Концепция трехэлектронной связи выводит проблему химической связи на совершенно иной уровень. И можно не сомневаться, что со временем появится экспериментальное подтверждение существования трехэлектронной связи и теоретическое обоснование (количественное), которое покажет химическую связь с совершенно иной точки зрения.

При описании поведения электронов в атомах или молекулах часто предполагается, что электроны движутся в консервативном поле. Но с помощью специальной теории относительности легко показать, что это не так. Более того, отсюда следует, что при

движении электронов поле в молекуле в принципе не может быть консервативным полем по определению. Но если поле не является консервативным полем, то наше понимание и описание химической связи не очень хорошо (тогда как мы объясним и опишем химическую связь...).

Вот стандартное доказательство из университетского учебника по физике [8]:

«Взаимодействие неподвижных зарядов (точечных) полностью описывается законом Кулона:

$$F = k (q1*q2)/r^2$$

q1-------r----------q2

Рассмотрим взаимодействие двух точечных зарядов, покоящихся в системе координат К1.

Однако в другой системе координат К2, движущейся относительно К1, эти заряды движутся с одинаковой скоростью и их взаимодействие становится более сложным для описания. Так как из-за движения зарядов электрическое поле в каждой точке пространства переменно ($E = (k*q)/r^2$, E — электрическое поле) и поэтому в системе К2 генерируется магнитное поле (в системе К1 магнитного поля нет, так как электрическое поле постоянно). Мы помним, что переменное электрическое поле порождает магнитное поле, а переменное магнитное поле порождает электрическое поле.

Закона Кулона недостаточно для анализа взаимодействия движущихся зарядов, и это связано с релятивистскими свойствами пространства и времени и релятивистским уравнением движения (закон Кулона здесь ни при чем). Это следует из следующих соображений.

Релятивистское уравнения движения:

$$dp/dt = F \quad (1)$$

Инвариантно и имеет одинаковую форму во всех инерциальных системах отсчета. Так в системе координат К2, которая движется прямолинейно и равномерно относительно К1:

$$dp2/dt2 = F2 \quad (2)$$

В левой части уравнений (1) и (2) входят чисто механические величины (поведение которых известно при переходе из одной системы координат в другую). Следовательно, левые части уравнений (1) и (2) можно связать некоторой формулой. Но тогда правые части этих уравнений (уравнения силы) должны быть связаны между собой. Такая связь обусловлена требованием релятивистской инвариантности уравнения движения. Поскольку в левые части уравнений (1) и (2) входят скорости, то заключаем, что взаимодействие движущихся зарядов зависит от скорости движения и не сводится к кулоновской силе.

Таким образом доказано, что взаимодействие движущихся зарядов осуществляется не только кулоновской силой, но и силой другой природы, называемой магнитной».

Заметим, кулоновское поле консервативно, магнитное поле не консервативно.

Теория относительности А. Эйнштейна – одна из самых фундаментальных и больших теорий в физике, и не нужно ждать, пока произойдет какое-то грандиозное открытие и теория относительности вдруг станет неверной. Этого никогда не произойдет. Будет еще чуть-чуть другая интерпретация теории относительности «в сторону» квантовой механики. И произойдет слияние теории относительности и квантовой механики, а затем то, что сейчас кажется парадоксальным в квантовой механики и в теории относительности получит разумное и наглядное объяснение. И да, мы глубже поймем и квантовую механику, и теорию относительности. Ничего сверхпринципиального не произойдет, будет только «расширение территории понимания» что в квантовой механике, что в теории относительности. Можно

предположить, что некоторые научные теории, которые сейчас больше похожи на научную фантастику чем на науку, после слияния квантовой механики и теории относительности строго переместятся в область фантастики. Объединение квантовой механики и теории относительности неизбежно, так как обе теории фундаментальны в своих областях (в своих пределах, микро- и макромире), и эти области должны объединиться. Это неизбежно, и это лишь вопрос времени. Впереди интересное время...

Принцип неопределенности Гейзенберга и химическая связь.

Принцип неопределенности Гейзенберга:

$$\Delta x * \Delta p \geq \hbar/2$$

Принцип неопределенности Гейзенберга является одним из самых фундаментальных принципов квантовой механики [9]. Если принцип неопределенности неверен, то вся квантовая механика неверна. Гейзенберг обосновал принцип неопределенности, чтобы спасти квантовую механику. Он понимал, что если можно с любой точностью измерить и координату и импульс микрочастицы, то квантовая механика рухнет, и поэтому дальнейшее обоснование было уже вопросом техники. Именно принцип неопределенности запрещает микрочастицам в квантовой механике иметь траекторию. Если координаты электрона измеряются через определенные промежутки времени Δt, то их результаты не лежат на какой-то гладкой кривой. Наоборот, чем точнее произведены измерения, тем более «дергаными», хаотичными будут результаты. Гладкую траекторию можно получить только при малой точности измерения, например, траектория электрона в камере Вильсона (ширина траектории огромна по сравнению с микромиром, поэтому точность мала).

Гейзенберг сформулировал принцип неопределенности следующим образом:

если вы изучаете тело и можете определить x-компоненту импульса с

неопределенностью Δp, то вы не можете одновременно определить координату x тела с точностью большей, чем $\Delta x = h/\Delta p$.

Вот более общая формулировка принципа неопределенности: невозможно каким-либо образом устроить прибор, определяющий, какое из двух взаимоисключающих событий произошло, без разрушения интерференционной картины.

Следует сразу сказать, что принцип неопределенности Гейзенберга неизбежно вытекает из корпускулярно-волновой природы микрочастиц (есть корпускулярно-волновой дуализм - есть принцип неопределенности, нет корпускулярно-волнового дуализма - нет принципа неопределенности, и в принципе квантовой механики тоже). Следовательно, существует точная количественная аналогия между соотношением неопределенностей Гейзенберга и свойствами волн.

Рассмотрим изменяющийся во времени сигнал, например звуковую волну. Бессмысленно говорить о частотном спектре сигнала в любой момент времени. Для точного определения частоты необходимо некоторое время наблюдать за сигналом, при этом теряется точность определения времени. Иными словами, звук не может одновременно иметь точное значение времени своей фиксации, как его имеет очень короткий импульс, и точное значение частоты, как у непрерывного (и, в принципе, бесконечно долгого) чистого тона (чистой синусоиды). Положение во времени и частота волны математически полностью аналогичны координате и импульсу частицы (квантово-механическому).

Также нужно четко понимать, что принцип неопределенности Гейзенберга практически запрещает предсказывать поведение, например, электрона в будущем (в классическом понимании, как Ньютон мог предсказать положение планет). Это означает, что если электрон находится в состоянии, наиболее полно описываемом в квантовой механике, то его поведение в следующие моменты принципиально

неоднозначно [10]. Поэтому квантовая механика не может делать строгих предсказаний (в классическом смысле). Задача квантовой механики состоит лишь в определении вероятности получения того или иного результата при измерении, и это принципиально. Именно поэтому принцип неопределенности имеет такое фундаментальное значение (нет принципа неопределенности - нет квантовой механики). Но это не значит, что мы не знаем каких-то «законов или переменных, которые от нас скрыты» и т.п. Нет. Это просто реальность. Это аналогично тому, как частица может проявлять корпускулярные и волновые свойства — только это реальность и ничего более. И даже если мы будем знать «скрытые параметры» (сравните с понимаем, почему проявляются волновые свойства и корпускулярные), то реальность не изменится, и принцип неопределенности тоже сработает, но мы поймем его более полно.

Необходимо добавить, что не все физические величины в квантовой механике измеримы одновременно, то есть, могут иметь одновременно определенные значения. Если физические величины могут одновременно иметь определенные значения, то в квантовой механике говорят, что их операторы коммутируют. Наборы таких физических величин (полные наборы), имеющие одновременно определенные значения, замечательны тем, что никакая другая физическая величина (не являющаяся их функцией) не может иметь в этом состоянии определенного значения. Полностью описываемые состояния (например, описание состояния электрона) в квантовой механике возникают в результате одновременного измерения полного набора физических величин. По результатам такого измерения можно определить вероятность результатов последующих измерений, независимо от того, что произошло с электроном до первого измерения.

Если физические величины не могут одновременно иметь определенные значения, то

их операторы не коммутируют. Принцип неопределенности Гейзенберга устанавливает предел точности одновременного определения пары физических величин, не описываемых коммутирующими операторами (например, координата и импульс, ток и напряжение, электрическое и магнитное поля).

Добавим немного истории. А. Эйнштейн предположил, что в квантовой механике существуют скрытые переменные, лежащие в основе наблюдаемых вероятностей. Ему не нравился принцип неопределенности, и его дискуссии с Н. Бором и В. Гейзенбергом сильно повлияли на квантовую механику и науку в целом.

В копенгагенской интерпретации квантовой механики (Н. Бор и последователи) принцип неопределенности принят на элементарном уровне, и именно в этой интерпретации считается, что это вообще нельзя предсказать никаким методом. И именно эту интерпретацию поставил под сомнение Эйнштейн, когда писал Максу Борну: «Бог не играет в кости». На что Нильс Бор ответил: «Эйнштейн, не указывай Богу, что делать». Эйнштейн был убежден, что эта интерпретация ошибочна. Его рассуждения основывались на том факте, что все уже известные распределения вероятностей были результатом детерминированных событий. Распределение подброшенной монеты или кости можно описать распределением вероятностей (50 % орла, 50 % решки). Но это не значит, что их физические движения непредсказуемы. Обычная механика может точно рассчитать, как приземлится каждая монета, если известны действующие на нее силы, а орлы/решки все равно будут распределены случайным образом (со случайными начальными силами). Но вряд ли этот опыт можно распространить на квантовую механику.

Позицию Бора и Эйнштейна надо рассматривать как взгляды с разных точек зрения на одно явление (проблему), и в итоге может оказаться, что они правы вместе. Это можно продемонстрировать с помощью лотереи. Несмотря на то, что теоретически

результаты лотереи можно однозначно предсказать по законам классической механики, зная все начальные условия (необходимо только определить все силы и возмущения и произвести необходимые расчеты), на практике результаты лотереи всегда вероятностны, и только теоретически их можно предсказать (попробуйте выиграть джекпот). Даже в этом простейшем случае нам будут «недоступны» все исходные данные для расчетов. Логично предположить, что квантовая система будет несравненно сложнее лотереи, и поэтому, если мы овладеем «истинными» законами квантового мира, останется вероятностная картина, поскольку микромир таков по своей сути. Более того, если подумать, то наш мир тоже вероятностный. Он детерминирован только в теории, а практически, в обыденной жизни мы можем предсказать, например, завтрашний день (или секунду, или год, или 10 лет) с определенной вероятностью (кто может гарантировать событие завтрашнего дня со 100 % вероятностью?). И что интересно, только прожив это (выполнив измерение), мы можем сказать, какая вероятность была реализована. Квантовая механика в действии.

Самое главное — поведение электронов в атоме, в молекуле и в химической связи (замечу, что химическая связь — самый сложный тест для квантовой механики), и здесь решающую роль играет вероятностная картина.

Рассмотрим атом, для описания электрона вводится понятие атомной орбитали.

Атомная орбиталь представляет собой одноэлектронную волновую функцию, полученную путем решения уравнения Шредингера. Э. Шредингер рассматривал электрон в атоме как отрицательно заряженное облако, плотность которого пропорциональна квадрату значения волновой функции в соответствующей точке атома. В таком виде понятие электронного облака воспринималось и в теоретической химии. Но с физической точки зрения верно, что электрон есть частица определенного размера (сейчас мы не будем разбирать радиус электрона и т.п. проблемы), то есть это

не волна и не облако с отрицательным зарядом. Возникло противоречие между трактовкой в химии и тем, что в реальном мире существует электрон (физическая интерпретация). Таким образом, Макс Борн обосновал вероятностную интерпретацию квадрата волновой функции. Э. Шредингер не сразу, но все же согласился с доводами М. Борна. Это современная точка зрения, и заметьте, что она не противоречива, верна и с точки зрения физики, и с точки зрения химии.

Вероятностная интерпретация волновой функции, это типичное волновое описание, соответствующее действительности. А разные толкования Шредингера и Борна были устранением противоречий в понимании между химиками и физиками, эдаким «взаимным согласованием вопроса физиками и химиками».

Удивительно, но при квантово-химическом описании молекул химическая связь фактически «терялась» [11], а для описания поведения электрона в молекуле были введены молекулярные орбитали (МО), полностью аналогичные по смыслу атомным орбиталям (АО). Но это противоречит принципу квантовой суперпозиции и квантовой механике в целом. Следует отметить, что даже при общих качественных представлениях видно, что поведение электронов в поле одного ядра (в атоме) и поведение электронов в поле двух ядер (химическая связь) — две большие разницы, которые качественно разные. Поэтому, для описания химической связи предлагается ввести понятие молекулярной орбитали (МО) именно для химической связи [11].

Стоит отметить, что процесс измерения в квантовой механике оказывает влияние на квантовую систему (например, на измеряемый электрон), и это влияние нельзя сделать сколь угодно малым при заданной точности измерения. Если бы даже наши возможности были безграничны (могли бы произвести «нулевое» возмущение микрообъекта при измерении), это ничего бы не изменило, так как такова природа микромира. Чем точнее измерение, тем сильнее будет возмущение. Это свойство

измерений логически связано с тем, что динамические характеристики электрона появляются только в результате самого измерения (у электрона нет траектории, потому что у него нет координаты без измерения, если бы электрон имел определенную координату в определенный момент времени, это означало бы, что он имеет траекторию, но это не так) [10]. Строго говоря, микрочастице нельзя приписать динамические характеристики, так как квантовый объект (например, электрон) не является корпускулой, а имеет корпускулярно-волновую природу. Если бы возмущения измерения на микрообъекте можно было сделать сколь угодно малыми, это означало бы, что измеряемая величина имеет определенное значение сама по себе, независимо от измерения. Но это запрещает принцип неопределенности Гейзенберга, а это как раз и есть следствие корпускулярно-волнового дуализма (микрочастица не корпускула!; а значит, не имеет траектории, а значит, и динамических характеристик без измерений).
Но если рассматривать измерение координат электрона, то в пределах применимости квантовой механики всегда можно измерить координаты электрона с любой точностью (электрон взаимодействует с «классическим» прибором при измерении, наблюдатель отсутствует).

Для дальнейшего анализа химической связи рассмотрим комптоновскую длину волны электрона:

$$\lambda c.e. = h / (me*c) = 2.4263 * 10^{(-12)}\ m$$

Комптоновская длина волны электрона эквивалентна длине волны фотона, энергия которого равна энергии покоя самого электрона (стандартный вывод приведен ниже):

$$\lambda = h / (m*v), \quad E = h * \gamma, \quad E = me * c^2, \quad c = \gamma * \lambda, \quad \gamma = c / \lambda$$

$$E = h * \gamma, \quad E = h * (c/\lambda) = me * c^2, \quad \lambda c.e. = h / (me*c)$$

где λ — длина волны Луи де Бройля, me — масса электрона, c, γ — скорость и частота света, h — постоянная Планка.

Более интересно рассмотреть, что происходит с электроном в области с линейными размерами, меньшими комптоновской длины волны электрона. Согласно неопределенности Гейзенберга в этой области мы имеем квантово-механическую неопределенность импульса не менее m*c и квантово-механическую неопределенность энергии не менее me * c^2:

$$\Delta p \geq me * c \quad \text{and} \quad \Delta E \geq me * c^2$$

что достаточно для рождения виртуальных электрон-позитронных пар. Поэтому в такой области электрон уже нельзя рассматривать как «точечный объект», так как он (электрон) часть своего времени проводит в состоянии «электрон + пара (позитрон + электрон)». В результате изложенного электрон на расстояниях, меньших комптоновской длины, является системой с бесконечным числом степеней свободы и его взаимодействие должно описываться в рамках квантовой теории поля. Самое главное, переход в промежуточное состояние «электрон + пара (позитрон + электрон)» осуществляется за время $\sim \lambda c.e. / c$

$$\Delta t = \lambda c.e. / c = 2.4263 * 10^{(-12)} / (3*10^8) = 8.1 * 10^{(-20)}\ s$$

Теперь попробуем использовать все вышеизложенное для описания химической связи, используя теорию относительности Эйнштейна и принцип неопределенности Гейзенберга. Для этого сделаем одно допущение: предположим, что длина волны электрона на боровской орбите (атома водорода) равна такой же комптоновской длине волны электрона, но в другой системе отсчета, и в результате возникает в 137 раз большая длина волны Комптона (из-за эффектов теории относительности):

$$\lambda c.e. = h / (me*c) = 2.4263 * 10^{(-12)}\ m$$

$$\lambda b. = h / (me*v) = 2 * \pi * R = 3.324\ Å$$

$$\lambda b. / \lambda c.e. = 137$$

где R = 0,529 Å — боровский радиус.

Поскольку длина волны де Бройля в атоме водорода (по Бору) в 137 раз больше комптоновской длины волны электрона, то вполне логично предположить, что энергия взаимодействия будет в 137 раз слабее (чем больше длина волны фотона, тем меньше частота, а значит и энергия). Отметим, что 1/137,036 — постоянная тонкой структуры, фундаментальная физическая постоянная, характеризующая силу электромагнитного взаимодействия, была введена в науку в 1916 году немецким физиком Арнольдом Зоммерфельдом как мера релятивистских поправок при описании атомных спектров в рамках теоретической модели атома Н. Бора (поэтому ее также называют константой Зоммерфельда) [12, 13].

Для описания химической связи воспользуемся принципом неопределенности Гейзенберга:

$$\Delta x * \Delta p \geq \hbar/2$$

С учетом ослабления энергии взаимодействия в 137 раз принцип неопределенности Гейзенберга можно записать в виде:

$$\Delta x * \Delta p \geq (\hbar*137)/2$$

Согласно последнему уравнению квантово-механическая неопределенность импульса электрона в химической связи должна быть не менее me*c, а квантово-механическая неопределенность энергии не менее me*c^2, что также должно быть достаточно для образования виртуальных электрон-позитронных пар. Поэтому в области химической связи в данном случае электрон нельзя рассматривать как «точечный объект», так как он (электрон) часть своего времени будет находиться в состоянии «электрон + пара (позитрон + электрон)», и поэтому его взаимодействие следует описывать в рамках квантовой теории поля.

Такой подход позволяет объяснить, как в случае многоэлектронных химических связей (двухэлектронных, трехэлектронных и т. д.) преодолевается отталкивание между

электронами: поскольку химическая связь фактически представляет собой «кипящую массу» электронов и позитронов, виртуальные позитроны «помогают» преодолеть отталкивание между электронами. Этот подход предполагает, что химическая связь фактически является замкнутым пространственным мешком (потенциальной ямой в энергетическом смысле), в котором происходит «кипение» реальных электронов, а также виртуальных позитронов и электронов, причем «объем» этого потенциального мешка равен реальному «объему» химической связи, а также пространственной мере квантово-механической неопределенности положения электрона.

Строго говоря, при таком рассмотрении электрон уже не имеет определенной энергии, импульса, координат и уже не является «точечной частицей», а фактически занимает «весь объем» химической связи. Можно утверждать, что в химической связи отдельный электрон обезличивается и теряет свою индивидуальность, фактически его не существует, а есть «кипящая масса» реальных электронов и виртуальных позитронов и электронов, которые флуктуациями сменяют друг друга. То есть, химическая связь — это фактически отдельная частица, как уже говорилось, полувиртуальная частица. Более того, этот подход может быть распространен на структуру элементарных частиц, таких как электрон или позитрон: элементарная частица в этом рассмотрении — это флуктуирующий вакуум, замкнутый в некоторый пространственный мешок, являющийся потенциальной ямой для этих флуктуаций.

Особо стоит отметить, что в этом рассмотрении электроны являются сильно взаимодействующими частицами, и поэтому принцип Паули неприменим к химической связи (подробнее смотри раздел «Принцип Паули и химическая связь») и не запрещает наличие тех же трехэлектронных связей с кратностью 1,5.

Сказанное легко продемонстрировать на примере химической связи длиной 1 Å. Тогда длина волны де Бройля записывается в виде (длина химической связи $L = 2*\Delta x$):

$$\lambda = 2*\pi*\Delta x$$

а принцип неопределенности Гейзенберга принимает вид:

$$\Delta x * \Delta p \geq (\hbar*137*2*\pi)/2$$

из чего получаем:

$$L * \Delta p \geq \hbar*137*2*\pi$$

где L — длина химической связи, а Δp — квантово-механическая неопределенность импульса каждого электрона в данной химической связи.

Отсюда получаем формулу для определения неопределенности импульса в химической связи:

$$\Delta p \geq (\hbar*137*2*\pi)/L$$

Произведя необходимые вычисления для длины 1 Å, получим:

$$\Delta p \geq (\hbar*137*2*\pi)/10^{(-10)}$$

$$\Delta p \geq 9.078*10^{(-22)}\ kg*m/s$$

То есть, неопределенность в импульсе больше me*c (me*c = 2,73*10^(-22) кг*м/с) (понятно, что неопределенность скорости электрона будет больше скорости света), что и должно быть исходя из наших предположений.

Принцип запрета Паули и химическая связь.

Принцип запрета Паули — это фундаментальный принцип квантовой механики, утверждающий, что два или более одинаковых фермиона (частицы с полуцелым спином) не могут одновременно находиться в одном и том же квантовом состоянии. Вольфганг Паули, швейцарский физик-теоретик, сформулировал этот принцип в 1925 году [14]. В химии именно принцип запрета Паули часто рассматривают как запрет на существование трехэлектронных связей с кратностью 1,5, но можно показать, что принцип запрета Паули не запрещает существование трехэлектронных связей. Для этого более подробно проанализируем сам принцип запрета Паули.

Согласно принципу запрета Паули в системе, состоящей из одинаковых фермионов, две (или более) частицы не могут находиться в одинаковых состояниях [15]. Соответствующие формулы волновых функций и определения приведены в ссылке (это стандартное рассмотрение системы фермионов), но мы сконцентрируем внимание на выводе: «...Конечно, в такой формулировке принцип запрета Паули применим только к системам слабо взаимодействующих частиц, когда можно говорить (хотя бы приблизительно о состояниях отдельных частиц)» [15]. То есть, принцип запрета Паули применим только к слабо взаимодействующим частицам, когда можно говорить о состояниях отдельных частиц.

Но если вспомнить, что любая классическая химическая связь образуется между двумя ядрами (это принципиальное отличие от атомных орбиталей), которые каким-то образом «натягивают» друг на друга электроны, то логично предположить, что при образовании химической связи, электроны уже нельзя рассматривать как слабо взаимодействующие частицы. Это предположение подтверждается введенным ранее представлением о химической связи как об отдельной полувиртуальной частице (естественно, составляющая «часть» частицы, не может быть слабо взаимодействующей).

Представления о химической связи, данные в главе «Принцип неопределенности Гейзенберга и химическая связь», категорически отвергают утверждения о химической связи как о системе слабо взаимодействующих электронов. Наоборот, из вышеприведенного описания следует, что в химической связи электроны «теряют» свою индивидуальность и «заселяют» всю химическую связь, то есть, электроны в химической связи «взаимодействуют максимально возможно», что прямо указывает на неприменимость принципа запрета Паули к химической связи. Более того, квантово-механическая неопределенность импульса и координаты, по сути, строго указывает на

то, что в химической связи электроны представляют собой систему «максимально» сильно взаимодействующих частиц, а вся химическая связь представляет собой отдельную частицу, в которой нет места для понятия «индивидуального» электрона, его скорости, координаты, энергии и тому подобного описания. Это в корне неверно. Химическая связь представляет собой отдельную частицу, называемую нами «полувиртуальной частицей», это составная частица, состоящая из отдельных электронов (сильно взаимодействующих), пространственно расположенных между ядрами.

Таким образом, введение трехэлектронной связи с кратностью 1,5 оправданное с химической точки зрения (просто объясняет строение молекулы бензола, ароматичность, строение органических и неорганических веществ и др.), подтверждается принципом запрета Паули и логическим допущением о химической связи как системе сильно взаимодействующих частиц (фактически отдельной полувиртуальной частицы) и, как следствие, неприменимость принципа запрета Паули к химической связи.

Примечания о химической связи.

Если рассматривать образование химической связи (одноэлектронной, многоэлектронной) строго теоретически, то трудно понять причину образования химической связи. Здесь есть несколько проблем:

1. При образовании химической связи, когда область «существования» электронов фактически уменьшается («объем» химической связи (МО) много меньше «объема» соответствующих АО, это подчеркивал Л. Полинг) по сравнению с исходными АО ((иными словами, что функция распределения электронов в двухатомной молекуле гораздо более сконцентрированна, чем в случае атомов), отталкивание между электронами неизбежно должно значительно возрастать. И тогда по закону Кулона

($F=f(1/r^2)$) это отталкивание не может быть никак скомпенсировано. Это отмечает и Л. Полинг, и мы предполагаем [16, стр. 88—90], что он поэтому анализировал взаимодействие атома водорода и протона во всем диапазоне длин (допустил, что атом водорода и H^+ сохраняются при сближении) и показал, что связь в этом случае не образуется (поскольку нет обменного взаимодействия или резонанса Полинга). Это фактически показало, что даже одноэлектронную связь нельзя объяснить только электромагнитным взаимодействием (то есть классический подход), а если перейти к многоэлектронной связи (двухэлектронной связи, трехэлектронной связи, и т. д.) и учесть отталкивание между связывающими электронами, становится очевидным, что классическое объяснение (электромагнитный подход) не может дать даже качественного объяснения причины образования химической связи. Отсюда неизбежно следует, что причина образования химической связи может быть объяснена только квантовой механикой. Причем химическая связь есть «чистый» квантово-механический эффект, в принципе на это строго указывает обменное взаимодействие, введенное квантовой механикой, но не имеющее физического обоснования, то есть, обменное взаимодействие есть чисто формальный, математический подход, что позволяет получить хоть какие-то результаты. Тот факт, что обменное взаимодействие не имеет физического смысла, может быть подтвержден тем, что обменный интеграл существенно зависит от выбора базисных волновых функций (точнее, интеграла перекрывания базисных функций), и поэтому при выборе определенной основы, он может быть меньше по модулю и даже менять знак на обратный, что означает, что два атома могут не притягиваться, а отталкиваться. Кроме того, обменное взаимодействие по определению не может быть применено к одноэлектронной связи, так как нет интеграла перекрывания, поскольку у нас один электрон (но резонанс Полинга можно применить для объяснения одноэлектронной связи).

2. Кроме того, используя теорию относительности А. Эйнштейна, можно показать, что при движении электронов поле в молекуле по определению не может быть консервативным полем [16, стр. 90—93]. При описании поведения электронов в атомах или молекулах часто (точнее почти всегда) предполагают, что движение электронов происходит в усредненном консервативном поле. Но это в корне неверно (исходя из теории относительности), и поэтому дальнейшие предположения не являются теоретически строгими. Более того, этот случай (применение теории относительности к химической связи) прямо указывает на то, что объяснить причину образования химической связи можно только используя совместно квантовую механику и теорию относительности А. Эйнштейна, что мы и попытаемся сделать [16, стр. 93 - 103].

3. Также особо стоит отметить, что при анализе принципа Паули [16, стр. 104 - 105] оказалось, что он неприменим к химическим связям, так как принцип Паули применим только к системам слабо взаимодействующих частиц (фермионов), когда можно говорить (хотя бы приблизительно, о состояниях отдельных частиц). Отсюда неизбежно следует, что принцип Паули не запрещает существование трехэлектронных связей с кратностью 1,5, что имеет очень важное теоретическое и практическое значение для химии. В химии введена трехэлектронная связь с кратностью 1,5, на основании которой легко объяснить строение молекулы бензола и многих органических и неорганических веществ [1].

4. Показано [11, 17], что основное предположение метода молекулярных орбиталей (а именно, что молекулярная орбиталь может быть представлена в виде линейной комбинации перекрывающихся атомных орбиталей) вступает в непреодолимое противоречие с принципом квантовой суперпозиции. Показано также, что описание квантовой системы, состоящей из нескольких частей (принятое в

квантовой механике), фактически запрещает в методе ВС приписывать членам уравнения соответствующие канонические структуры.

5. Смотри стр. 7 – 8 [11].

«...Поэтому для «восстановления» химической связи в соответствующих уравнениях и исключения противоречия с принципом квантовой суперпозиции необходимо не выражать МО в членах линейной комбинации АО, а постулировать существование МО как нового фундаментального качества, которое описывает специфическую химическую связь и не является производным от более простых структурных элементов. Тогда мы «вернем» химическую связь в расчетные методы и, возможно, значительно упростим квантово-химические расчеты. Это связано с тем, что энергия химических связей хорошо известна, а поскольку МО будет описывать химическую связь (а энергия химической связи известна), то будет легко рассчитать энергию МО, просто вычитая энергию химической связи из энергии АО.

Поскольку химическая связь является результатом взаимодействия фермионов и они взаимодействуют [5] по правилу Хюккеля (4n + 2) (или 2n, n - непарное), мы можем схематически изобразить молекулярные орбитали аналогично атомным орбиталям. Количество электронов по правилу Хюккеля будет: 2, 6, 10, 14, 18, …

Соответственно, молекулярные орбитали химической связи обозначаются так:

МО (s) - молекулярная s-орбиталь, 1 ячейка, может содержать до 2 электронов.

МО (p) - молекулярная p-орбиталь, 3 ячейки, может содержать до 6 электронов.

МО (d) - молекулярная d-орбиталь, 5 ячеек, может содержать 10 электронов.

МО (f) - молекулярная f-орбиталь, 7 ячеек, может содержать до 14 электронов.

МО (g) - молекулярная g-орбиталь, 9 ячеек, может содержать до 18 электронов.

Тогда обычная одинарная связь будет описываться молекулярной s-орбиталью (МО(s)). Для описания двойной связи нужно предположить, что она образована двумя

эквивалентными одинарными связями (как указал Л. Полинг [6]), а затем описывать двумя молекулярными s-орбиталями (2 МО(s)).

Тройная связь будет описываться молекулярной р-орбиталью (МО(р)), тогда все шесть электронов тройной связи будут занимать одну молекулярную р-орбиталь, что очень хорошо объясняет разницу между ацетиленом и этиленом (имеется в виду С-Н кислотность).

В бензоле 18 - электронная циклическая система может занимать одну молекулярную g-орбиталь (МО(g))...».

Принимая во внимание приведенные выше рассуждения о химической связи, можно сказать, что современные представления о химической связи не могут быть строго теоретически верными, а скорее являются качественными с эмпирическими количественными расчетами. Используя квантовую механику, а именно принцип неопределенности Гейзенберга и теорию относительности А. Эйнштейна, можно объяснить причину образования химической связи [16, стр. 93 — 103] и понять, как электроны образуют химическую связь, и как происходит сам процесс связывания в молекуле. Следует отметить, что химическая связь – это фактически отдельная частица (фермион или бозон в зависимости от числа электронов), которую мы назвали полувиртуальной частицей [1, стр. 12 – 13], и которая существует неопределенно долго в конкретной молекуле.

Теперь рассмотрим теорию резонанса Л. Полинга и химическую связь с позиций теории резонанса.

Важно понимать, что в реальности резонансных структур не существует, а теория резонанса — это просто очень удобная и наглядная модель для описания бензола. Понятие «резонанс» (в теории резонанса Л. Полинга) не предполагает реально происходящего резонанса между структурами Кекуле, это просто хорошее

название теории. Удачное, потому что ясно указывает на то, что при резонансе структур Кекуле образуется реальная молекула бензола, имеющая промежуточную между ними электронную структуру (структуры Кекуле). И самое главное, особо отмечу, что реальная структура бензола будет иметь энергию ниже энергии структур Кекуле (именно поэтому «теория резонанса» - это уменьшение энергии системы, а как известно при реальном резонансе (как физический процесс), можно сказать происходит «выброс» энергии). Это относится и к химическим связям.

Теория резонанса Л. Полинга распространилась не только на бензол, но и на химические связи [6, стр. 13 – 33, 43 – 45, 50 – 60, 78 – 82, 128 – 161, 194 – 225, 232 – 247, 255 – 278], по сути, это был единственный системный подход к описанию химической связи. И несмотря на то, что в строго теоретическом плане (в рамках квантовой механики) теория резонанса противоречит принципу квантовой суперпозиции, идея резонанса (то есть, представления о реальном физическом процессе) как подход к изучению химической связи очень успешна и плодотворна. Поскольку именно представление о резонансе ясно указывает на то, что в образовании химической связи должна быть «изюминка», то есть реальный физический процесс, приводящий к выделению энергии (энергии связи). Классическое, современное представление о химической связи фактически игнорирует физическое обоснование химической связи. Согласно современным представлениям, нет причин, по которым энергия должна выделяться при образовании химической связи. Наоборот, при концентрации электронов в межъядерной области, то есть при образовании химической связи, логично ожидать увеличения энергии системы (увеличивается кулоновское отталкивание между электронами). Более того, некоторые физики (или квантовые химики) вообще отрицают существование химической связи между двумя атомами и считают, что химическая связь является удачной для нефизиков концепцией

связи атомов. Естественно, химики с этим категорически не согласны, хотя и понимают причины такого восприятия химической связи.

Стоит отметить, что Гейзенберг впервые использовал понятие резонанса в квантовой механике для изучения квантовых состояний гелия [18].

Л. Полинг провел один год (1926 - 1927) в Европе, в альме матери квантовой механики. Фактически он изучал квантовую механику у А. Зоммерфельда (Мюнхен) и на семинарах Э. Шрёдингера (Цюрих), и великие физики, стоявшие у истоков квантовой механики, оказали на него глубокое влияние. После этой короткой (всего 1 год) командировки Л. Полинг понял, что только квантовая механика может быть теоретической основой для понимания химической связи. Более того, теперь очевидно, что физическая сущность, физическое обоснование различных процессов для него стали жизненно важными, поэтому в будущем родилась теория резонанса. Здесь необходимы некоторые пояснения.

В 20 - 30-е годы 20 века, после рождения квантовой механики, многие великие физики пытались решить проблему химической связи. Но все их попытки были неудачными, вернее, не очень успешными. Но это не следует воспринимать как провал, напротив, они четко обозначили проблему: если причина образования химической связи объясняется реальным физическим процессом (очевидно, так и должно быть), то приемлемое решение невозможно найти. Более того, создание методов МО и ВС, а по сути введение обменного взаимодействия в химию для объяснения химической связи, не решили этой проблемы, так как обменное взаимодействие не имеет физического смысла, это «чисто» формальный подход, и это хорошо известно в квантовой механике. Кроме того, и метод МО, и метод ВС, и, естественно, обменное взаимодействие противоречат принципу квантовой суперпозиции, то есть, самой квантовой механике [11, стр. 3—7]. И самое главное, эти формальные методы не содержат концептуальных

идей решения проблемы химической связи.

Теория резонанса — это «чисто» химическая теория, из идеи которой следует, что должен существовать физический процесс (реальный), являющийся причиной образования химической связи, мы предполагаем, что поэтому Полинг назвал теорию «теорией резонанса». И можно не сомневаться, что только такой подход приведет к полному пониманию химической связи. Для этого необходимо одновременно применять квантовую механику и теорию относительности А. Эйнштейна [16, стр. 93 - 103]. Вероятно, это единственный путь (сочетание квантовой механики и теории относительности), не очень простой, но, пожалуй, единственный, который приведет к пониманию как химических, так и многих физических процессов.

Насколько удачно применение понятия реального физического процесса, можно показать на следующем примере. В 1935 году в статье Лайнуса Полинга, Л. О. Броквея и Дж. Й. Бича «Зависимость межатомного расстояния от резонанса одинарной и двойной связи» [19] было установлено, что кратность связи в бензоле равна 1,5 (на основе двух структур Кекуле). Но такой способ расчета Полинга в рамках теории резонанса в 1937 году подвергся критике со стороны Уильяма Пенни (английский математик и профессор математической физики Имперского колледжа Лондона) [20]. Суть возражений заключается в следующем: если кратность связи в бензоле равна 1,5, то логически следует, что теплоты образования бензола и циклогексатриена (или одной из «резонансних» структур Кекуле) также совпадают, что противоречит теории резонанса (реальная молекула бензола должна иметь меньшую энергию). Отсюда логически следует, что кратность в бензоле должна быть больше 1,5 и У. Пенни получил число 1,62 [20].

Как видим, представление о реальном физическом процессе (поскольку это уменьшение энергии реальной молекулы бензола) привело к пониманию того, что

кратность связи в бензоле должна быть больше 1,5, что и было показано квантово-химическими расчетами (1,67) [21]. Концепция трехэлектронной связи объясняет, почему происходит увеличение кратности: это следствие взаимодействия двух трехэлектронных связей на противоположных сторонах бензола (с разными спинами), бензол просто немного «сжимается, уменьшается». Расчеты дают кратность 1,66 [1, стр. 5]. Если логически подумать, то из теории резонанса следует понятие трехэлектронной связи: резонанс двух структур Кекуле «создает» реальную молекулу бензола с усредненным между структурами Кекуле распределением электронов, то есть, мы фактически получаем бензол с трехэлектронной связью.

Одноэлектронная связь в He2+.

Рассмотрим химическую связь в молекулярном ионе гелия He2+. Атом гелия имеет 2 электрона и один энергетический уровень (1S). Поэтому в He2+ 3 электрона. Предположение, что связь в He2+ трехэлектронная, неверно. Кратность связи по-прежнему определяется фундаментальным правилом октета. Поэтому легко показать, что связь в He2+ одноэлектронная (отсюда ее кратность равна 0,5). Для этого достаточно применить к He2+ правило октета, смотри схему.

$$He_2^{\oplus} \Longrightarrow \left[He \;\; \overset{+}{\bullet} \; \Big(\overset{-}{\bullet} \Big) \; \overset{+}{\bullet} \;\; He \right]^{\oplus} \Longrightarrow \left[\overset{+}{\dot{He}} \;\; \bar{\bullet} \;\; \overset{+}{\dot{He}} \right]^{\oplus}$$

Из схемы видно, что для выполнения правила октета в He2+ связь должна быть одноэлектронной (одновременно обоим атомам может принадлежать только один электрон). Более того, можно сделать вывод, что правило октета в «сжатом» виде отражает баланс кулоновских сил отталкивания-притяжения между электронами и ядрами. Так как на примере He2+ очевидно, что при трехэлектронной связи ядра остались бы без электронов, что привело бы к сильному увеличению отталкивания

между ядрами гелия.

Одноэлектронная связь в He2+ объясняет, почему He2+ и H2+ одинаково стабильны, потому что они связаны одноэлектронной связью: сравните энергии связей и длину связи [6, стр. 23 - 26, стр. 262]:

E (He2+) = 58 kcal/mole L (He2+) = 1.09 Å

E (H2+) = 61 kcal/mole L (H2+) = 1.06 Å

Тот факт, что использование метода МО в He2+ дает трехэлектронную связь (с кратностью 0,5), не должен вводить в заблуждение, поскольку метод МО противоречит квантовой механике [11].

Если проделать аналогичную процедуру с кислородом, у которого две трехэлектронные связи (вычисляем октет электронов каждого атома), то сразу становится понятно, почему кратность кислорода равна 2 (несмотря на две трехэлектронные связи, смотри схему).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ.

В заключение добавим, что развитие теории трехэлектронной связи и химической связи по Гейзенбергу приведет не только к количественному расчету химической связи (полному), но и к применению этих расчетов к синтезу веществ (использование в лаборатории) и предсказанию биологической активности химических веществ. Это значит, что можно будет легко рассчитать основные свойства

молекулы (вещества) по структурной формуле, причем точность должна быть такой, чтобы не требовался синтез веществ. Аналогично и с биологической активностью: развитие теории (например, развития электроотрицательности в органических соединениях и т.п.) химической связи должно привести к более глубокому пониманию зависимости биологической активности от химического строения, что, несомненно, будет иметь взрывное действие на появление новых лекарств (и новых классов), и значительно упростит задачу поиска новых препаратов по структуре. Для расчета химической связи по Гейзенбергу придется прибегнуть к введению новых понятий и постулатов в квантовую механику, что также благоприятно скажется на ее развитии.

Благодарность.

Авторы посвящают эту работу отцу и деду Безверхнему Дмитрию Владимировичу, а также матери и бабушке Безверхней Евгении Григорьевне, за создание идеальных условий для учебы (школа, университет) и работы над теорией трехэлектронной связи. К сожалению, их уже нет в нашем мире, и мы очень по ним скучаем.

ЛИТЕРАТУРА.

1. Bezverkhniy V. D. (2017) Theory of Three-Electron Bond in the Four Works with Brief Comments. Organic Chem Curr Res 6: 182. Doi: 10.4172/2161-0401.1000182, https://www.omicsonline.org/open-access/theory-of-threeelectron-bond-in-the-four-works-with-brief-comments-2161-0401-1000182.pdf , p. 12.

2. Linnett J. W., J. Am. Chem. Soc., 1961, 83, 2643.

3. Pauling L. Kekule and chemical bonding. Theoretical Organic Chemistry. Translation from English edition of 1959 year, Edited by R. H. Freidlin. Moscow. Foreign Literature Publishing House, 1963, p. 8.

4. Bent bond. Wikipedia. https://en.wikipedia.org/wiki/Bent_bond

5. Pauling, L. (1928). "The Application of the Quantum Mechanics to the Structure of

the Hydrogen Molecule and Hydrogen Molecule-Ion and to Related Problems". Chemical Reviews 5 (2): 173–213. Doi: 10.1021/cr60018a003.

6. Pauling L. Nature of the chemical bond. Translated from english by M. E. Dyatkina under the guidance of professor Y. K. Sirkin. State Scientific and Technical Publishing House of Chemical Literature. Moscow, Leningrad, 1947, p. 25.

7. Burrau Ø (1927). "Berechnung des Energiewertes des Wasserstoffmolekel-Ions (H+2) imNormalzustand". DanskeVidensk. Selskab. Math.-fys. Meddel. (in German). M 7:14: 1–18. Burrau Ø (1927). "The calculation of the Energy value of Hydrogen molecule ions (H+2) in their normal position" (PDF). Naturwissenschaften (in German) 15 (1): 16–7. Doi:10.1007/BF01504875.

8. Matveev A. N. Electricity and magnetism. Moscow. Higher school, 1983, pp. 55-56.

9. Heisenberg W. Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik. Zeitschrift für Physik. 1927. Vol. 43, pp. 172—198. (English translation in book: Wheeler J. A., Zurek H. Quantum Theory and Measurement. Princeton Univ. Press. 1983, pp. 62-84).

10. Landau L. D., Lifshitz E. M. Theoretical physics in 10 volumes. Volume 3. Quantum mechanics. Fourth Edition. Moscow. Science, 1989, pp. 17 – 18. ISBN 5-02-014421-5 (Volume 3).

11. Bezverkhniy V. D., Bezverkhniy V. V. Quantum-mechanical analysis of the MO method and VB method from the position of PQS. http://vixra.org/pdf/1704.0068v1.pdf , https://dx.doi.org/10.2139/ssrn.3066398

12. Sommerfeld A. The structure of the atom and spectra. Moscow: Gostekhizdat, 1956. Vol. 1, p. 81.

13. Sommerfeld A. Zur Quantentheorie der Spektrallinien. Annalen der Physik. 1916. Vol. 356 (51), pp. 1—94.

14. Pauli W. Uber den Zusammenhang des Abschlusses der Elektronengruppen in Atom mit der Komplexstruktur der Spektren, Z. Phys., 1925, 31, 765-783.

15. Davydov A. S. Quantum mechanics. Second edition. Publishing house "Science". Moscow, 1973, p. 334.

16. Bezverkhniy V. D., Bezverkhniy V. V. Review. Benzene on the basis of the three-electron bond. (The Pauli exclusion principle, Heisenberg's uncertainty principle and chemical bond). http://vixra.org/pdf/1710.0326v4.pdf , https://dx.doi.org/10.2139/ssrn.3065288 .

17. Bezverkhniy V. D., Bezverkhniy V. V. Quantum-mechanical aspects of the L. Pauling's resonance theory. http://vixra.org/pdf/1702.0333v2.pdf , https://dx.doi.org/10.2139/ssrn.3065282 .

18. W. Heizenberg, Z. Phys. 39, 499 (1926).

19. Linus Pauling, L. O. Brockway, J. Y. Beach. The Dependence of interatomic distance on single bond-double bond resonance. J. Am. Chem. Soc., 1935, *57* (12), pp 2705–2709. DOI: 10.1021/ja01315a105.

20. Bykov G. V. History of organic chemistry. Structural theory. Physical organic chemistry. Calculation methods. Moscow. Publishing House "Chemistry", 1976, p. 81.

21. March J. Advanced organic chemistry. Reactions, Mechanisms, and Structure. In 4 volumes. Mir, Moscow, 1987, vol.1, p. 48 (Russian translation from Advanced organic chemistry. Reactions, Mechanisms, and Structure. Third edition. Jerry March, Professor of Chemistry Adelphi University. New York, 1985).